

УДК 535.51

## УЧЕТ ВЛИЯНИЯ ЕСТЕСТВЕННОГО ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ КРЕМНИЕВЫХ ПЛАСТИН МЕТОДОМ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЭЛЛИПСОМЕТРИИ

**Н.И. Стаськов<sup>1</sup>, И.В. Ивашкевич<sup>1</sup>, А.Б. Сотский<sup>1</sup>, Л.И. Сотская<sup>2</sup>**<sup>1</sup>Могилевский государственный университет им. А.А. Кулешова, Могилев<sup>2</sup>Белорусско-Российский университет, Могилев

## THE ACCOUNT OF INFLUENCE OF THE NATURAL SURFACE LAYER UNDER INVESTIGATION OF SILICON PLATES BY THE METHOD OF SPECTRAL ELLIPSOMETRY

**N.I. Stas'kov<sup>1</sup>, I.V. Ivashkevich<sup>1</sup>, A.B. Sotski<sup>1</sup>, L.I. Sotskaya<sup>2</sup>**<sup>1</sup>Mogilev State A. Kuleshov University, Mogilev<sup>2</sup>Belarusian-Russian University, Mogilev

Исследуется возможность исключения влияния естественного поверхностного слоя при определении методом спектральной эллипсометрии дисперсии показателей преломления  $n(\lambda)$  и поглощения  $k(\lambda)$  полупроводниковой подложки. Показано, что при решении обратных эллипсометрических задач можно использовать простейшую модель переходного слоя с одним параметром, который определяется толщиной и показателем преломления слоя.

**Ключевые слова:** спектральная эллипсометрия, поверхностный слой, оптическая модель, дисперсия оптических характеристик.

The possibility of exclusion of the influence of a natural surface layer is investigated at determination by the method of spectral ellipsometry dependencies  $n(\lambda)$  and  $k(\lambda)$  for a semiconductor substrate. It is shown that in the solution of the inverse ellipsometric problems a simple model of the transition layer with a single parameter which is determined by the thickness and refractive index of the layer can be used.

**Keywords:** spectral ellipsometry, surface layer, optical model, dispersion of optical characteristics.

### Введение

Для решения обратных оптических задач необходима априорная информация о дисперсионных характеристиках материалов, входящих в исследуемую структуру. Обычно эти характеристики определяют оптическими методами для каждого материала на основании модели чистой подложки [1]. Однако в реальных условиях на поверхности образцов всегда существуют естественные неоднородные переходные слои, оптические и геометрические характеристики которых неизвестны. Несмотря на то, что толщина этих слоев обычно значительно меньше длины волны излучения ( $d \ll \lambda$ ) [1]–[4], они существенно влияют на измеряемые поляризационные углы. Поэтому наличие этих слоев необходимо учитывать в моделях среды, используемых при решении прямой эллипсометрической задачи. Известно [5], что успех решения обратной задачи напрямую связан с числом параметров модели исследуемой среды. Поэтому для переходного слоя необходима модель с минимальным числом свободных параметров. Такая модель может быть создана на основе метода интегральных уравнений, при использовании которого не требуется накладывать ограничения на толщину слоя и его оптическую однородность.

Целью данной работы является сравнение эффективности моделей, в которых учитываются естественные поверхностные слои, при определении методом спектральной эллипсометрии дисперсионных зависимостей показателей преломления и поглощения  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  кремниевых промышленных пластин КДБ12.

### 1 Модели переходного слоя

Для решения обратных задач эллипсометрии используется уравнение

$$\operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} = R_p / R_s,$$

в котором содержатся, с одной стороны, измеряемые поляризационные углы  $\Psi$  и  $\Delta$  при заданных углах падения  $\varphi_0$ , а с другой – амплитудные коэффициенты отражения  $p$ - и  $s$ -поляризованного излучения.

В выбранной спектральной области эти коэффициенты зависят от вида геометрической модели комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(y)$  (ось  $oy$  перпендикулярна поверхности образца).

В настоящее время в эллипсометрии используется несколько моделей переходного поверхностного слоя:

а) неоднородный слой на подложке.

Для  $p$ -поляризованного излучения методом интегральных уравнений можно получить выражение для коэффициента отражения

$$R_p = \frac{\sigma_+ \varepsilon_- - \sigma_- \varepsilon_+ + i(\varepsilon_+ \varepsilon_- \beta^2 I_2 + \sigma_+ \sigma_- I_1)}{\sigma_+ \varepsilon_- + \sigma_- \varepsilon_+ - i(\varepsilon_+ \varepsilon_- \beta^2 I_2 + \sigma_+ \sigma_- I_1)} + O\left(\frac{d}{\lambda}\right)^2, \quad (1.1)$$

где неоднородный переходной слой на поверхности подложки учитывается всего двумя комплексными интегралами

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} [\varepsilon(y) - \theta(\varepsilon)] dy, \\ I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{1}{\varepsilon(y)} - \theta\left(\frac{1}{\varepsilon}\right) \right] dy, \quad (1.2)$$

имеющими порядок  $O\left(\frac{d}{\lambda}\right)$ . В (1.2) фигурируют ступенчатые функции, отличные от нуля только в пределах переходного слоя:  $\theta(\varepsilon) = \varepsilon_+$  при  $y > 0$ ,  $\theta(\varepsilon) = \varepsilon_-$  при  $y < 0$ ,  $\theta(1/\varepsilon) = 1/\varepsilon_+$  при  $y > 0$ ,  $\theta(1/\varepsilon) = 1/\varepsilon_-$  при  $y < 0$ .

Для  $s$ -поляризованного излучения в таком случае имеем

$$R_s = \frac{\sigma_+ - \sigma_- + k_0 I_1}{\sigma_+ + \sigma_- - k_0 I_1} + O\left(\frac{d}{\lambda}\right)^2. \quad (1.3)$$

Из (1.1) и (1.3) легко получить отношение  $R_p/R_s$ , которое содержится в основном уравнении эллипсометрии для переходного слоя с любой зависимостью  $\varepsilon(y)$ . При  $d \ll \lambda$  в отношении  $R_p/R_s$  можно пренебречь малыми величинами

порядка  $O\left(\frac{d}{\lambda}\right)^2$ . Тогда

$$\frac{R_p}{R_s} = \frac{(\sigma_+ \varepsilon_- - \sigma_- \varepsilon_+)(\sigma_+ + \sigma_-)}{(\sigma_+ \varepsilon_- + \sigma_- \varepsilon_+)(\sigma_+ - \sigma_-)} + i \frac{k_0 2\sigma_+ (\varepsilon_+ - \varepsilon_-) \beta^2 \varepsilon_-}{(\sigma_+ + \sigma_-)^2 (\sigma_+ \varepsilon_- + \sigma_- \varepsilon_+)^2} J, \quad (1.4)$$

где  $k_0 = 2\pi/\lambda$ ,  $\varepsilon_-$ ,  $\varepsilon_+$  — диэлектрические проницаемости сред под слоем и над ним,

$$\beta = k_0 \sqrt{\varepsilon_+} \sin \varphi_0, \quad \sigma_{\pm} = \sqrt{k_0^2 \varepsilon_{\pm} - \beta^2}, \\ J = k_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\varepsilon(y) - \varepsilon_+)(\varepsilon(y) - \varepsilon_-)}{\varepsilon(y)} dy. \quad (1.5)$$

В (1.5) область интегрирования не выходит за пределы переходного слоя;

б) однородный слой на подложке [1]. В такой модели

$$\frac{R_p}{R_s} = \frac{R_{01p} + R_{12p} e^{-2i\delta}}{1 + R_{01p} R_{12p} e^{-2i\delta}} \cdot \frac{1 + R_{01s} R_{12s} e^{-2i\delta}}{R_{01s} + R_{12s} e^{-2i\delta}}; \quad (1.6)$$

в) бесконечно тонкий слой ориентированных диполей на подложке, который характеризуют двумя параметрами  $\gamma_y$  и  $\gamma_x$  ( $xy$  — плоскость падения излучения) [2];

г) бесконечно тонкий проводящий слой на подложке, который в вертикальном направлении характеризуется поляризуемостью  $\alpha_y$ , а в горизонтальном направлении — высокочастотной проводимостью [3];

д) бесконечно тонкий слой ориентированных диполей на подложке, имеющий в вертикальном направлении поляризуемость  $\alpha_y$  [4]. При использовании этой модели принимают условия, что при падении  $s$ -поляризованного излучения ( $\mathbf{E} \parallel \mathbf{z}$ ) из среды с комплексным показателем преломления  $N_0 = n_0 - ik_0$  под углом  $\varphi_0$  на среду с показателем преломления  $N_2 = n_2 - ik_2$  диполи переходного слоя ориентируются в плоскости раздела сред ( $xz$ ) и что их связанные заряды не обуславливают разрыва линий напряженности поля  $E_z$ . При этом амплитудный коэффициент отражения имеет вид:

$$R_s = \frac{N_0 \cos \varphi_0 - N_2 \cos \varphi_2}{N_0 \cos \varphi_0 + N_2 \cos \varphi_2}. \quad (1.7)$$

В напряженности  $\mathbf{E}$  падающего на границу раздела  $p$ -поляризованного излучения ( $\mathbf{E} \in xy$ ) можно выделить тангенциальную  $E_x$  и нормальную  $E_y$  составляющие. Компонент  $E_y$  обуславливает поляризацию двух граничащих сред, вследствие которой на границе раздела (в окрестности плоскости  $xz$ ) появляется тонкий двойной слой связанных зарядов, который нельзя охарактеризовать макроскопическими параметрами  $n_1$ ,  $k_1$ ,  $d$ . Тогда амплитудный коэффициент отражения  $p$ -волны можно представить в виде [3]:

$$R_p = \frac{N_2 \cos \varphi_0 - N_0 \cos \varphi_2 + i \frac{2\pi}{\lambda} \alpha_y N_0^3 N_2 \sin^2 \varphi_0}{N_2 \cos \varphi_0 + N_0 \cos \varphi_2 - i \frac{2\pi}{\lambda} \alpha_y N_0^3 N_2 \sin^2 \varphi_0}. \quad (1.8)$$

При  $\alpha_y \ll \lambda$  из (1.7) и (1.8) получим

$$\frac{R_p}{R_s} = \frac{\bar{R}_p}{\bar{R}_s} + 2i\alpha_y \frac{2\pi}{\lambda} N_0^3 N_2 \sin^2 \varphi_0 \times \frac{N_2 \cos \varphi_0 (N_0 \cos \varphi_0 + N_2 \cos \varphi_2)}{(N_0 \cos \varphi_0 - N_2 \cos \varphi_2)(N_2 \cos \varphi_0 + N_0 \cos \varphi_2)^2}. \quad (1.9)$$

Если  $\varphi_0 = 0$ , то  $R_p/R_s = -1$ . При  $\varphi_0 = 90^\circ$   $R_p/R_s = 1$ .

В отличие от выражения (1.6), в котором величина  $R_p/R_s$  зависит от пяти параметров, в формулах (1.9) и (1.4) содержится только по три неизвестных параметра:  $\alpha_y$  или  $J$  соответственно и  $n_2$ ,  $k_2$ . Так как устойчивость решения обратной задачи эллипсометрии снижается при увеличении числа свободных параметров модели  $\varepsilon(y)$  исследуемой среды [5], для описания переходного слоя следует выбрать модель с минимальным числом параметров. При заданных  $\varphi_0$ ,  $N_0$ ,  $\lambda$ ,  $\Psi_e$ ,  $\Delta_e$  параметр  $\alpha_y$  явно выражается через  $N_2$ . По физическим соображениям величина  $\alpha_y < 0$

является действительной и имеет размерность длины. Так как отношение  $R_p/R_s$  комплексно, то в общем случае  $\alpha_y = \alpha_{y1} + i\alpha_{y2}$ . Параметр  $N_2$  легко определяется при условии минимальности значения  $\alpha_{y2}$ .

Влияние неоднородных поверхностных слоев на коэффициенты отражения  $R_s$  и  $R_p$  полимерных пленок было экспериментально исследовано в работе [6] при проверке известного соотношения  $R_p = R_s^2$ , которое должно выполняться для подложки без слоя при угле падения  $\varphi_0 = 45^\circ$ . Оказалось, что присутствие переходного слоя на пленках полистирола приводит к значительному увеличению  $R_p$  в сравнении с увеличением  $R_s$ .

## 2 Экспериментальные результаты и их анализ

Эксперименты выполнены с использованием пластин из кремния марки КДБ-12, протравленных в буферном растворе после предварительной шлифовки и полировки. На рисунке 2.1 представлены рентгеновские фотоэлектронные спектры (РФЭС) таких пластин, зарегистрированные на установке ESCALAB MRH (Alka). При оценке толщины образовавшегося приповерхностного слоя по интенсивности двух спектральных линий, длины волн которых соответствуют ионизации атомов кремния, находящихся в  $2p$ -состоянии в твердотельном кремнии и оксиде кремния (энергии связи  $2p$ -электронов соответственно 99,15 эВ и 103,4 эВ), показано, что она не превышает 3 нм.

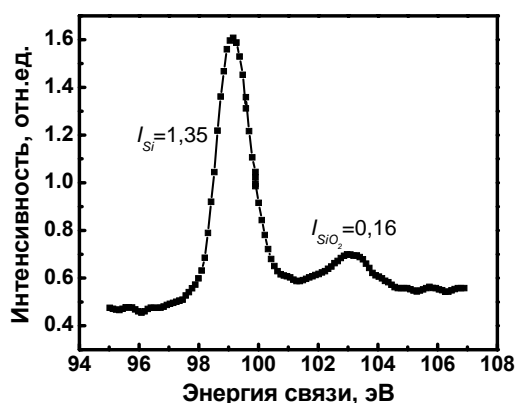


Рисунок 2.1 – Рентгеновские фотоэлектронные спектры пластин кремния марки КДБ-12

На рисунке 2.2 представлены распределения концентраций атомов кислорода и кремния по глубине приповерхностного слоя пластины КДБ-12, определённые методом оже-спектроскопии в условиях пошаговой ионно-плазменной обработки на РН-600 (Perkin Elmer). Толщина неоднородного приповерхностного слоя, оцененная по этим данным, не превышает 2 нм.

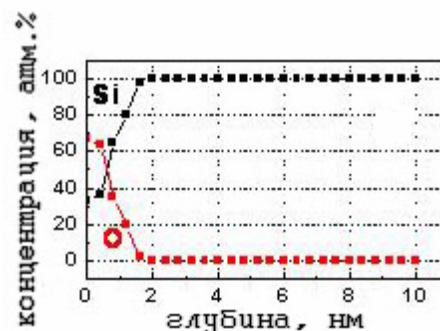


Рисунок 2.2 – Распределение концентраций кремния и кислорода по глубине в пластине из кремния КДБ-12

Измерения спектров поляризационных углов  $\Psi_e(\lambda)$  и  $\Delta_e(\lambda)$  пластин КДБ-12 осуществляли на спектральном эллипсометре ES-2 с бинарной модуляцией состояния поляризации [7] в диапазоне длин волн  $380 \text{ нм} \leq \lambda \leq 1000 \text{ нм}$  при углах падения излучения  $65^\circ$  и  $70^\circ$ . Решение обратных эллипсометрических задач было получено методом наименьших квадратов. При этом минимизировался функционал невязки спектральных зависимостей – экспериментальных  $\text{tg}\Psi_e(\lambda)$ ,  $\cos\Delta_e(\varphi_0)$  и теоретических  $\text{tg}\Psi_t(\lambda, x_j)$ ,  $\cos\Delta_t(\lambda, x_j)$ :

$$I(x_j) = \sum_{k=1}^m \left\{ \left[ \text{tg}\Psi_e(\lambda_k) - \text{tg}\Psi_t(\lambda_k, x_j) \right]^2 + \left[ \cos\Delta_e(\lambda_k) - \cos\Delta_t(\lambda_k, x_j) \right]^2 \right\}. \quad (2.1)$$

В формуле (2.1)  $x_j$  ( $j = \overline{1, n}$ ) – вещественные параметры электродинамической модели плоско-слоистой среды,  $m$  – число точек в спектре для фиксированного угла падения излучения  $\varphi_0$ . Оптимальные значения  $x_j$  определяются из условия минимума функции  $I(x_j)$ .

Хорошо известно, что описанная задача является некорректно поставленной. Это означает, что ее решение неустойчиво в силу погрешностей регистрации зависимостей  $\text{tg}\Psi_e(\varphi_0, \lambda)$  и  $\cos\Delta_e(\varphi_0, \lambda)$ . Кроме того, при численном отыскании минимума целевой функции  $I(x_j)$  серьезную проблему составляет существование ложных локальных минимумов [5].

Как было отмечено выше, указанные проблемы быстро усугубляются при увеличении числа неизвестных параметров  $x_j$ . Поэтому успешное решение обратных задач спектральной эллипсометрии возможно при использовании модели с минимальным числом неопределённых (варьируемых) параметров, адекватно характеризующих дисперсионные свойства сред.

С учетом вышеизложенных обстоятельств, для описания дисперсии кремния была выбрана модель Тока-Лоренца [8]. Принимая во внимание неоднородность поверхностного слоя пластин из кремния при решении обратной задачи в рамках модели (а), мы минимизировали целевую

функцию  $I(x_j)$  семи параметров (пять параметров модели Тока-Лоренца для дисперсии кремния и два дополнительных параметра для поверхностного слоя (1.2)). По спектрам  $\text{tg}\Psi_e(\varphi_0, \lambda)$  и  $\cos\Delta_e(\varphi_0, \lambda)$ , измеренным при угле падения  $70^\circ$ , были рассчитаны оптические функции  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  КДБ-12 (таблица 2.1).

Таблица 2.1 – Дисперсионные зависимости показателей преломления и показателей поглощения кремния марки КДБ-12

$\lambda$ , нм	$n_2$	$k_2$
480	4,320	$8,036 \cdot 10^{-2}$
530	4,079	$4,804 \cdot 10^{-2}$
580	3,931	$3,098 \cdot 10^{-2}$
630	3,830	$2,073 \cdot 10^{-2}$
680	3,759	$1,406 \cdot 10^{-2}$
730	3,706	$0,952 \cdot 10^{-2}$
780	3,664	$0,633 \cdot 10^{-2}$
830	3,632	$0,407 \cdot 10^{-2}$
880	3,605	$0,247 \cdot 10^{-2}$
930	3,584	$0,136 \cdot 10^{-2}$
980	3,566	$0,063 \cdot 10^{-2}$

Ранее методом многоугловой эллисометрии было установлено [4], что поверхностный слой на пластинах КДБ-12 при  $\lambda = 632,8$  нм можно учесть в рамках модели (б) – с параметрами  $n_1 = 1,456$ ;  $k_1 = 0$ ;  $d = 3,8$  нм – и модели (д) – с параметром  $\alpha_s = (-1,756 - i5,2 \cdot 10^{-5})$  нм.

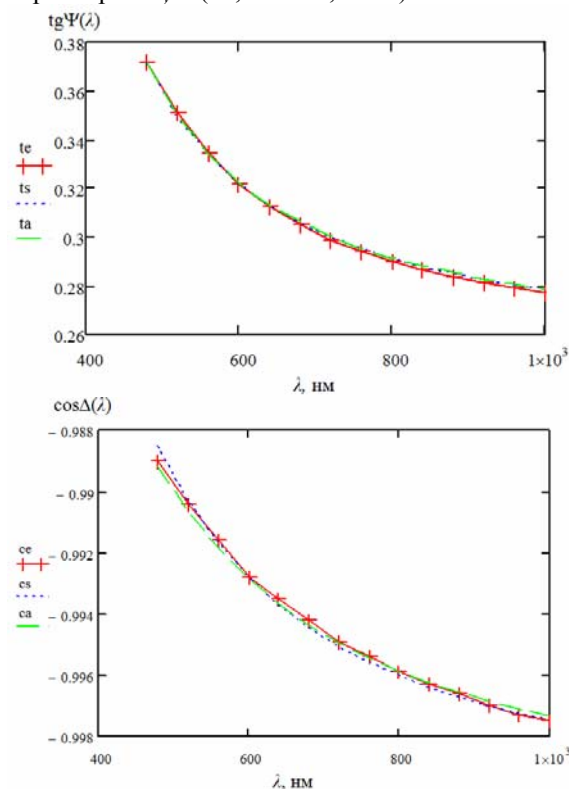


Рисунок 2.3 – Спектры  $\text{tg}\Psi(\lambda)$  и  $\cos\Delta(\lambda)$  кремниевых пластин

Приемлемость рассматриваемых моделей учёта влияния переходных слоев на параметры подложек оценивалась при сопоставлении полученных экспериментально (кривые  $te$  и  $ce$ ) и рассчитанных по формулам (1.6) (кривые  $ts$  и  $cs$ ) и (1.8) (кривые  $ta$  и  $ca$ ) поляризационных спектров кремниевой пластины (рисунок 2.3). Анализируемые спектры получены при угле падения излучения  $\varphi_0 = 65^\circ$ . Спектры поляризационных углов, рассчитанные на основе модели (а), практически не отличаются от экспериментальных и на рисунке не приведены. Функции  $n_2(\lambda)$  и  $k_2(\lambda)$  подложек, использованные во всех обсуждаемых моделях, были одинаковыми (они приведены в таблице 2.1).

### Заключение

Таким образом, при использовании трёх различных моделей (а, б, д) тонкого поверхностного слоя, локализованного на подложке, получены практически одинаковые спектры  $\text{tg}\Psi(\lambda)$  и  $\cos\Delta(\lambda)$ , которые характерны для пластины из кремния марки КДБ12. Толщина этого слоя, определенная неразрушающим оптическим методом, удовлетворительно согласуется с данными, полученными другими методами, при использовании которых исходная структура слоя нарушается. На основе интегральных уравнений удалось получить основное уравнение эллисометрии, в котором переходный слой с произвольным профилем диэлектрической проницаемости учитывается посредством двух комплексных интегралов. При решении обратных эллисометрических задач для подложек с естественными поверхностными слоями, если  $d \ll \lambda$ , можно использовать простейшую модель переходного слоя с одним комплексным параметром, который зависит от толщины и показателя преломления слоя. В частности, варьируя значения этих двух величин, можно обеспечить получение любого значения комплексного интеграла  $J$  в (1.5). В спектральной эллисометрии существенно также, что дисперсией интегральных характеристик  $J$  и  $\alpha_s$  можно пренебречь вследствие малости их значений.

Заметим также, что модель (а), в отличие от моделей (б) и (д), может быть использована при исследовании подложек с толстыми неоднородными слоями.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Аззам, Р. Эллисометрия и поляризованный свет / Р. Аззам, Н. Башара. – М. : Мир, 1981. – 583с.
2. Сивухин, Д.В. Общий курс физики : в 5 т. – Т. 4. Оптика. – М. : Наука, 1980. – 752 с.
3. Пшеницын, В.И. Эллисометрия в физико-химических исследованиях / В.И. Пшеницын, М.И. Абаев, Н.Ю. Лызлов. – Л. : Химия, 1986. – 152 с.

4. Стаськов, Н.И. Моделирование переходного слоя слоем диполей при эллипсометрическом исследовании диэлектриков и полупроводников / Н.И. Стаськов, В.В. Филиппов, Н.А. Крекотень // Оптика неоднородных структур : материалы 3-й междунар. научн.-практ. конф., Могилев, 2011 г. / МГУ им. А.А. Кулешова. – Могилев, 2011. – С. 107–111.

5. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М. : Наука, 1979. – 285с.

6. Определение оптических постоянных пленок полистирола методом НПВО / Н.И. Стаськов [и др.] // ЖПС. – 1980. – Т. 32. – № 2. – С. 343–347.

7. Спектральная эллипсометрия многослойных гетероструктур ZnS/ZnSe / В.И. Ковалев [и др.] // ЖПС. – 2002. – Т. 69. – № 2. – С. 258–263.

8. Jellison, G.E. Spectroscopic ellipsometry data analysis: measured versus calculated quantities / G.E. Jellison // Thin Solid Films. – 1998. – Vol. 313–314. – P. 33–39.

*Поступила в редакцию 24.11.11.*